

УДК 543.422.8

СПЕКТРАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТРУБКИ, РАССЕЯННОГО НА ПОЛЯРИЗАТОРЕ

Б.И.Китов

НИИ прикладной физики Иркутского государственного университета
664003, Иркутск, бульвар Гагарина, 20
b_kitov@mail.ru

Поступила в редакцию 25 сентября 2002 г.

Получена формула для расчета спектра рассеянного на однородной плоской мишени смешанного излучения массивного анода рентгеновской трубки

Возбуждение флуоресценции с помощью предварительно поляризованного излучения рентгеновской трубки позволяет примерно на два порядка увеличить контрастность

аналитической линии [1]. Однако из-за уменьшившейся при поляризации интенсивности первичного излучения регистрация флуоресценции может осуществляться только на бескристалльных рентгеновских спектрометрах с полупроводниковыми детекторами. Главным недостатком таких приборов является необходимость отделения полезного сигнала от рассеянного на пробе тормозного рентгеновского излучения. Поляризация никогда не достигается настолько полно, чтобы не заметить эту компоненту, даже когда регистрация спектра флуоресценции происходит в направлении параллельном вектору электрического поля поляризованного первичного излучения.

Установим спектральную функцию рассеянного излучения, имея в виду, что причиной искажения спектральной функции тормозного излучения является абсорбция рассеянного в теле поляризатора излучения.

Пусть под углом α к поверхности поляризатора направлен поток неполяризованного рентгеновского излучения, возбужденный в трубке с мас-

Китов Борис Иванович – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник Иркутского госуниверситета.

Область научных интересов: взаимодействие рентгеновского излучения с веществом.

сивным анодом. Рассеиватель-поляризатор не обязательно является плоским - для повышения светосилы спектрометра его делают и криволинейным, например, в виде цилинд-

рического зеркала [2].

Рентгеновское излучение проникает вглубь поляризатора, диффузно рассеивается на электронах его атомов и распространяется по всем направлениям, в том числе и в пределах бесконечно малого телесного угла $\delta\Omega$. При угле рассеяния θ выход излучения из поляризатора происходит под углом $\theta - \alpha$. При малых углах θ отбирается в основном поляризованное излучение. При когерентном рассеянии длина волны каждого кванта рассеянного рентгеновского излучения λ_s сохраняется равной первоначальной $\lambda_s = \lambda_{\text{coh}} = \lambda$, при некогерентном рассеянии длина волны $\lambda_s = \lambda_{\text{incoh}} > \lambda$ увеличивается в соответствии с законом Комптона.

В настоящее время при расчете спектральной плотности тормозного излучения (размерность: фотон/электрон/стерадиан/нм) применяется формула Крамерса [3], дополненная учетом поглощения излучения в аноде и в окне трубки и учетом обратного рассеяния электронов от анода [4-6]:

$$N(\lambda) = 1.085 \cdot 10^{-6} \cdot Z \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_{ch}} - \frac{1}{\lambda} \right) \frac{R}{L} \cdot \frac{f(\chi)}{L} \cdot \exp[-\mu_{Be}(\lambda) \rho_{Be} d_{Be}], \quad (1)$$

где Z - атомный номер анода рентгеновской трубки; d_{Be} , ρ_{Be} , $\mu_{Be}(\lambda)$ - соответственно толщина окна, плотность материала окна и массовый коэффициент ослабления материалом окна рентгеновской трубки излучения с длиной волны λ ; $L = \ln \left(\frac{1166}{J} \frac{E_0}{2} \right)$; $f(\chi)$ - поправка на поглощение излучения в аноде; R - фактор обратного рассеяния электронов; J - средний потенциал ионизации атомов анода, эВ; E_0 - начальная энергия электронов, кэВ.

Интенсивность характеристической линии f (размерность: фотон/электрон/стерадиан) была получена, исходя из закона торможения электронов Бете и зависимости сечения ионизации атома от энергии электрона Томсона-Уидингтона, согласно [6]:

$$N_f = \frac{0.0199 \cdot \omega_q n_q b_q}{Z} P_f (u \ln u - u + 1) \cdot f(\chi) \cdot R \frac{\exp[-\mu_{Be}(\lambda_f) \rho_{Be} d_{Be}]}{\ln \left(\frac{1166}{J} \bar{E} \right)}, \quad (2)$$

где b_q - константа, определяемая энергетическим состоянием возбужденного атома; n_q - количество электронов в q -м электронном слое атома анода; P_f - вероятность испускания линии f серии q характеристического излучения анода; \bar{E} - средняя энергия электрона; $u = E/E_q$ - перенапряжение; ω_q - квантовый выход флуоресценции q -оболочки атома анода.

Интенсивность рассеяния на бесконечно толстом образце рентгеновского излучения с длиной волны λ описывается формулой

$$N_{disp} = N_{prim} \frac{\frac{d\sigma}{d\Omega}}{\frac{\mu(\lambda)}{\sin \alpha} + \frac{\mu(\lambda_{disp})}{\sin(\theta - \alpha)}}. \quad (3)$$

Здесь $\mu(\lambda)$ и $\mu(\lambda_{disp})$ - соответственно массовые коэффициенты ослабления в веществе поляризатора первичного и рассеянного излучения. При когерентном рассеянии $\mu(\lambda) = \mu(\lambda_{disp})$. В формуле (3) в случае рассеяния характеристического излучения под N_{prim} можно понимать интенсивность N_f линии f анода, а в случае рассеяния тормозного излучения - интенсивность $N(\lambda) \cdot d\lambda$ участка непрерывного спектра шириной $d\lambda$. Дифференциальный массовый коэффициент рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{cph}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{incoh}}{d\Omega}$ представляет собой сумму его когерентной и некогерентной составляющих.

Выбор толщины поляризатора является методом оптимизации, так как ее увеличение до некоторого предела повышает интенсивность рассеянного излучения, но, с другой стороны, из-

за эффекта многократного рассеяния уменьшает степень поляризации. Для расчета интенсивности рассеянного рентгеновского излучения на поляризаторе толщиной D из материала с удельной плотностью ρ формула (3) дополняется экспоненциальным сомножителем:

$$N_{disp} = N_{prim} \frac{\frac{d\sigma}{d\Omega}}{\frac{\mu(\lambda)}{\sin \alpha} + \frac{\mu(\lambda_{disp})}{\sin(\theta - \alpha)}} \left(1 - \exp \left(-\frac{\mu(\lambda) \rho D}{\sin \alpha} - \frac{\mu(\lambda_{disp}) \rho D}{\sin(\theta - \alpha)} \right) \right), \quad (4)$$

Применение формул (3) и (4) к нахождению спектральной функции рассеянного тормозного излучения заключается в сложении на едином волновом интервале двух независимых распределений когерентно и некогерентно рассеянного излучения.

Аппроксимация зависимости атомного дифференциального коэффициента рассеяния от угла рассеяния θ , от атомного номера Z и от длины волны падающего излучения λ приведена в статье [7]. Массовый дифференциальный коэффициент когерентного рассеяния может быть рассчитан по формуле

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{N}{A} \cdot \frac{d\sigma_{coh}^T}{d\Omega} \cdot [Z \cdot (e^{-j} + 0.12)]^2, \quad (5)$$

где $N = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ - число Авогадро; A - атомный вес вещества поляризатора.

$$j = \frac{5.91}{\sqrt{Z}} \cdot \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\lambda}, \quad (6)$$

Рассеяние на свободном электроне оценивается по формуле Томпсона

$$\frac{d\sigma_{coh}^T}{d\Omega} = r_0^2 \cdot \frac{1 + \cos^2 \theta}{2}. \quad (7)$$

Здесь $r_0 = \frac{e^2}{m_0 c^2}$ - формула для расчета классического радиуса электрона, в которой e - заряд электрона; m_0 - масса покоя электрона, c - скорость света в вакууме. С учетом этого $r_0^2 = 7.94 \cdot 10^{-26} \text{ см}^2$.

Массовый дифференциальный коэффициент некогерентного рассеяния согласно [7] записывается следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{incoh}}{d\Omega} = \frac{N}{A} \cdot d \frac{d\sigma_{incoh}^{N-K}}{d\Omega} \cdot Z \cdot (1 - e^{-5V}), \quad (8)$$

где

$$V = \frac{2.21}{\sqrt{Z^2}} \cdot \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\lambda_{incoh}}. \quad (9)$$

Длина волны некогерентного излучения $\lambda_{incoh} = \frac{12.395}{E_{incoh} \text{ (кВ)}}$ может быть найдена из формулы Комптона [8]:

$$\varepsilon_{\text{incoh}} = \frac{\varepsilon}{1 + \frac{\varepsilon}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta)}, \quad (10)$$

где ε - энергия первичного фотона; $\varepsilon_{\text{incoh}}$ - энергия некогерентно рассеянного фотона; $m_0 c^2 = 511 \text{ кэВ}$ - энергия покоящегося электрона.

Входящее в формулу (8) дифференциальное сечение Нишины-Клейна вычисляется по формуле из работы [8]:

$$\frac{d\sigma_{\text{e-NK}}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{\varepsilon_{\text{incoh}}}{\varepsilon} \right)^2 \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{\text{incoh}}} + \frac{\varepsilon_{\text{incoh}}}{\varepsilon} - \sin^2 \theta \right). \quad (11)$$

Отличие рассчитанных по формулам (5)-(8) значений от табличных значений этих величин [9] составляет от 3 до 10 %.

Теоретическая оценка формы спектра рассеянного излучения была выполнена для алюминиевого поляризатора. Расчет сделан для рентгеновской трубки с молибденовым анодом, имеющей бериллиевое окно толщиной 0,05 см, для напряжения 40 кВ, при угле рассеяния $\theta = 20^\circ$ и угле падения $\alpha = 10^\circ$.

На рис. 1 показаны результаты расчета спектральных функций. Видно, что толщина поляризатора сказывается на форме спектра рассеянного тормозного излучения только в сравнительно узком диапазоне D от 0 до 0,1 см (крив. 2-4), за пределами которого спектр можно считать не зависящим от D .

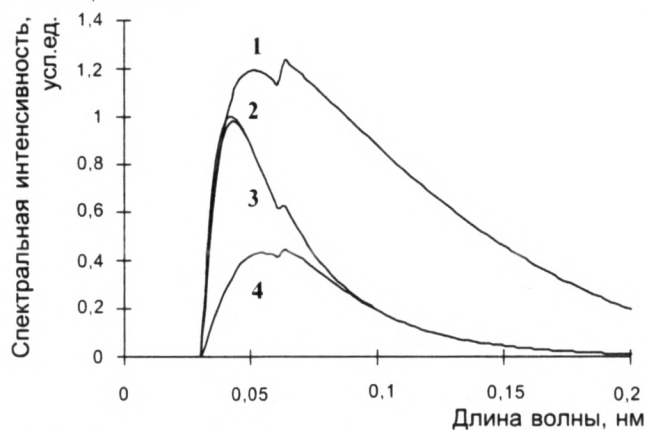


Рис. 1. Форма спектральной функции тормозного излучения до рассеяния (1) и после рассеяния на поляризаторе толщиной 1 см (2), 0,1 см (3) и 0,01 см (4)

Наиболее значительное искажение спектра рассеянного излучения по сравнению со спектром первичного тормозного излучения (крив. 1) наблюдается для поляризатора самой малой толщины (крив. 4). Масштаб для графика 1 на рис. 1 выбран в 25 раз меньшим, чем масштаб, в котором изображены крив. 2-4.

О вносимых в смешанный спектр искажениях после рассеяния на поляризаторе можно судить по изменению отношения интенсивности

наиболее яркой линии характеристического спектра к интегральной интенсивности тормозного излучения $\eta = \frac{N_{\alpha_1}}{\int N_{\lambda}} d\lambda$. На рис. 2 для тех же условий расчета, для которых были рассчитаны графики рис. 1, показана зависимость η от толщины поляризатора D . Отношение интенсивностей характеристического и тормозного излучения стабилизируется на одном уровне при $D > 0,1 \text{ см}$. При меньшей толщине поляризатора роль жесткой компоненты тормозного излучения заметно ослабевает. Это объясняется недостаточной насыщенностью слоя вещества рассеивателя для фотонов с малыми длинами волн.

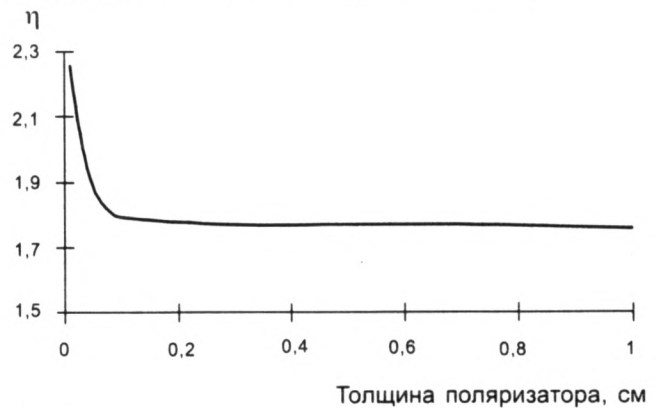


Рис. 2. Зависимость отношения интенсивности $\text{MoK}\alpha_1$ (линии анода) к интегральной интенсивности тормозного излучения от толщины алюминиевого поляризатора

В искажении формы спектральной функции по сравнению с первоначальной участвуют два процесса: усиление некогерентного рассеяния с ростом θ и λ и ослабление с ростом этих параметров интенсивности когерентного рассеяния. На рис. 3 показана спектральная функция рассеянного на поляризаторе тормозного излучения, возбужденного при разности потенциалов на электродах трубки 40 кВ и при углах рассеяния, и равных 2, 10 и 20° .

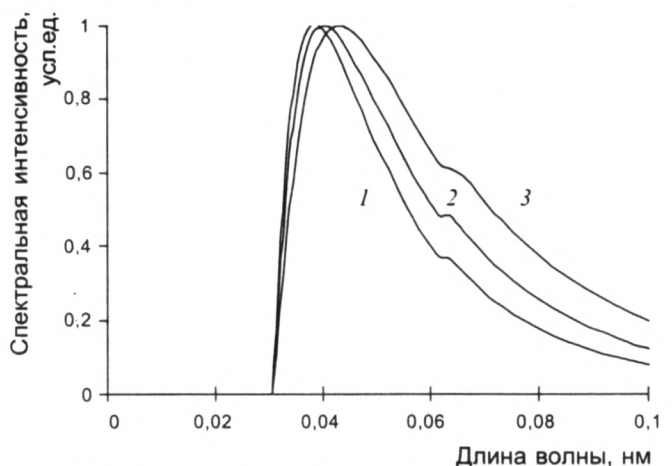


Рис. 3. Спектральная функция тормозного излучения при углах рассеяния $\theta = 2^\circ$ (1), 10° (2) и 20° (3)

Для наглядности максимальные значения всех трех спектральных функций были заданы одинаковыми.

Максимум тормозного излучения смещается в длинноволновую сторону. Этот результат, хорошо известный в физике рентгеновских лучей, косвенно подтверждает правильность сконструированной выше математической модели для расчета N_l .

Пространственное распределение рассеянного излучения, представленное в виде зависимости интегральной интенсивности тормозного излучения от угла рассеяния θ , приведено на рис. 4.

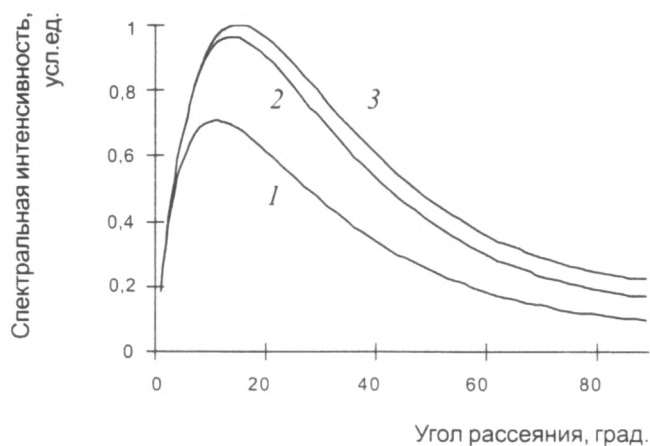


Рис. 4. Зависимость интегральной интенсивности тормозного излучения от угла рассеяния при $D = 0,01$ см (1), $0,1$ см (2), 1 см (3) (Напряжение на трубке 40 кВ)

Расчет выполнен для поляризатора с $D = 0,01$, $0,1$ и 1 см. При сопоставлении графиков наблюдается небольшое смещение положения макси-

мума спектральной функции. Наибольшая интенсивность возникает при углах $\theta = 12-15^\circ$. Характерным является резкий спад интенсивности при уменьшении угла рассеяния и в области его малых значений. Из того факта, что график 2 незначительно отличается от графика 3, следует, что насыщение рассеивающего слоя поляризатора наступает уже при $D = 0,1$ мм. Использование поляризатора большей толщины почти не увеличит интенсивность рассеяния, но может ухудшить степень поляризации из-за многократного рассеяния в глубине вещества.

Таким образом, при вычислении спектральной функции рассеянного излучения дополнительно используются 4 инструментальных параметра: угол рассеяния θ , угол падения первичного излучения на поляризатор α , удельная плотность ρ и толщина последнего D , и фундаментальные параметры: дифференциальные коэффициенты рассеяния когерентного и некогерентного рассеяния.

Особенностью алгоритма является то, что при каждом текущем значении λ вместо прямого расчета по (1) производятся следующие вычисления.

1. Устанавливается граничная длина волны $\lambda_{incoh}^{min} = \lambda_0 + \Delta\lambda$ ниже которой в спектре отсутствуют кванты некогерентно рассеянного излучения. Здесь $\Delta\lambda = 0,0242 \cdot (1 - \cos\theta)$ — комptonовский сдвиг длин волн.

2. На интервале изменений текущей длины волны в пределах $\lambda_0 < \lambda < \lambda_{incoh}^{min}$ расчет спектральной интенсивности рассеянного тормозного излучения производится по формуле

$$N_{coh}(\lambda) = N(\lambda) \cdot \frac{\frac{1}{\sin\alpha} \cdot \frac{d\sigma_{coh}(\lambda)}{d\Omega}}{\frac{1}{\sin\alpha} + \frac{1}{\sin(\theta - \alpha)}} \left(1 - \exp\left(\frac{-1}{\sin\alpha} + \frac{-1}{\sin(\theta - \alpha)} \right) \mu(\lambda) \rho D \right) \quad (12)$$

которая следует из (3), при $\lambda = \lambda_s$. Здесь $N_{coh}(\lambda)$ рассчитывается по формуле (1), а дифференциальный коэффициент когерентного рассеяния либо рассчитывается по приближенной формуле (5), либо выбирается из таблиц.

3. На интервале $\lambda_{incoh}^{min} < \lambda < \lambda_{q_i}$, где λ_{q_i} — длина волны q -края поглощения i -го элемента, полная

спектральная интенсивность $N_{disp}(\lambda) = N_{coh}(\lambda) + N_{incoh}(\lambda - \Delta\lambda)$ при текущей длине волны λ складывается из двух составляющих: когерентной составляющей $N_{coh}(\lambda)$, рассчитываемой по формуле (12) и некогерентно рассеянного тормозного излучения с уменьшенной на $\Delta\lambda$ длиной волны по сравнению с текущей длиной волны.

$$N_{incoh}(\lambda) = N(\lambda - \Delta\lambda) \cdot \frac{\frac{d\sigma_{incoh}(\lambda - \Delta\lambda)}{d\Omega}}{\frac{\mu(\lambda - \Delta\lambda)}{\sin\alpha} + \frac{\mu(\lambda)}{\sin(\theta - \alpha)}} \left(1 - \exp\left(-\frac{\mu(\lambda - \Delta\lambda)}{\sin\alpha} - \frac{\mu(\lambda)}{\sin(\theta - \alpha)} \right) \rho D \right) \quad (13)$$

4. Интенсивность рассеянной характеристической f -линии с длиной волны λ_f . Если $\lambda_{q_i} < \lambda_f < (\lambda_{q_i} - \Delta\lambda)$, то флуоресценция определяемого эле-

мента возбуждается только когерентной составляющей рассеянного излучения и достаточным является только ее расчет:

$$N_{coh.f} = N_f \frac{\frac{1}{\sin \alpha} \cdot \frac{d\sigma_{coh}(\lambda_f)}{d\Omega}}{\frac{\mu(\lambda_f)}{\sin \alpha} + \frac{1}{\sin(\theta - \alpha)}} \left(1 - \exp \left(\frac{-1}{\sin \alpha} + \frac{-1}{\sin(\theta - \alpha)} \right) \mu(\lambda_f) \rho D \right) \quad (14)$$

5. Для более жесткой характеристической f-линии, то есть при $\lambda_0 < l_f \leq (\lambda_{q_1} - \Delta\lambda)$, возбуждение флуоресценции i-го элемента осуществляется,

кроме того, и некогерентной составляющей, интенсивность которой рассчитывается по формуле

$$N_{incoh.f} = N_f \frac{\frac{d\sigma_{coh}(\lambda_f)}{d\Omega}}{\frac{\mu(\lambda_f)}{\sin \alpha} + \frac{\mu(\lambda_f + \Delta\lambda)}{\sin(\theta - \alpha)}} \left(1 - \exp \left(-\frac{\mu(\lambda_f)}{\sin \alpha} - \frac{\mu(\lambda_f + \Delta\lambda)}{\sin(\theta - \alpha)} \right) \rho D \right) \quad (15)$$

Выводы

Для Al-го поляризатора наибольшая интегральная интенсивность рассеяния излучения наступает при угле рассеяния $\theta = 12^\circ - 15^\circ$. Его, по видимому, следует признать оптимальным, так как дальнейшее уменьшение угла рассеяния с

целью повышения степени поляризации приведет к резкому падению интегральной интенсивности первичного излучения. Следует так же отметить малую оптимальную толщину поляризатора. Его поверхностный слой становится насыщенным уже при $D = 0,1$ см.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ryon R.W. Improved X-Ray fluorescence capabilities by excitation with high intensity polarized X-rays / R.W. Ryon, J.D. Zart // Adv. X-Ray Anal. 1978. V.22. P.453-460.
2. Жалсараев Б.Ж. Поляризационный спектрометр с новой рентгенооптической схемой // Тез.докл. III Всерос. и IV Сиб. конф. по рентгеноспектральному анализу. Иркутск, 1998. С.22.
3. Kramers H. A. On the theory of X-ray absorbtion and of the continues X-ray spectrum // Phyl. Mag. 1923. V.46, № 275. P.836—871.
4. Pella P.A. An analytical algorithm for calculation of spectral distribution of X-ray tubes for quantitative X-ray fluorescence analysis / P.A.Pella, L.Feng, J.A.Small // X-Ray Spectrometry. 1985. V.14, №3. P.125-135.
5. Бахтиаров А.В. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии. Л.: Недра, 1985. 144 с.
6. Расчет спектрального распределения первичного излучения при рентгенофлуоресцентном анализе /
- А.Л.Финкельштейн, Т.Н.Гуничева, В.П.Афонин и др. / Заводская лаборатория. 1981. Т.47, №11. С.28—31.
7. Бахтиаров А.В. Формулы для приближенного вычисления дифференциальных сечений рассеяния рентгеновского излучения малых энергий / А.В.Бахтиаров, Г.А.Пшеничный // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. Л.: Машиностроение, 1973. Вып.12. С.68-72.
8. Жуковский А.Н. Высокочувствительный рентгенофлуоресцентный анализ с полупроводниковыми детекторами / А.Н.Жуковский, Г.А.Пшеничный, А.В.Мейер. М.: Энергоатомиздат, 1991. 161 с.
9. Таблицы и формулы рентгеноспектрального анализа: Дифференциальные коэффициенты рассеяния для рентгенорадиометрического анализа: Методические указания / Сост. О.С.Маренков. Под ред. Н.И.Комяка. Л.: Машиностроение, 1984. 137 с.

* * * * *

SPECTRAL DISTRIBUTION OF SCATTERED X-RAY TUBE RADIATION ON POLARIZER
B.I.Kitov

The formula was derived to calculate the X-ray tube massive anode's mixed radiation scattered on the homogeneous flat target.